# 19 | 胸有成竹：如何快速定位合适的机器学习算法？

2021-10-11 黄佳

《零基础实战机器学习》 课程介绍 >

**讲述：黄佳**

时长 22:43 大小 20.80M

你好，我是黄佳。欢迎来到零基础实战机器学习。

首先，恭喜你闯过了所有的业务关卡，我们即将开启这个课程的第三个模块：持续赋能篇，这也是我们的最后一个模块。在前面的动手实战过程中，相信你已经对机器学习中的多种算法胸有成竹了！

那么这儿先回顾一下我们一起学习了哪些算法。

在获客关，我们用 RFM 值给电商用户做了分组画像。其中，我们学习了无监督学习中**K-Means类算法**，这也是我们这个课程中唯一一个监督学习之外的算法。在变现关，我们预测了用户生命周期价值 LTV，并讲解了各种模型优化方式。在此过程中，我们学习了**线性回归**、**决策树**和**随机森林算法**。

在激活关的深度学习部分，我们学习了如何用 **CNN 网络**对图片分类；并用 **RNN 网络**处理了时序数据，预测 App 的激活数。在留存关预测用户是否会流失的部分，我们通过**逻辑回归算法**和深度学习中的 **DNN 网络**解决了二元分类问题。在裂变关，我们评估了裂变海报的最佳受众群体。在这个实战中，我们用 **XGBoost** 这种集成学习方法完成了多元分类。

当然，面对机器学习这个深度全然不可测的海洋，我们在这个课程中使用过的算法只是沧海一粟。不过，我们所选择的这 9 种算法，是在机器学习入门阶段中最为常用、也最为实用的算法，它们不仅能有效地帮助我们解决诸多实际问题，也能为我们在机器学习领域进一步的钻研打下坚实的基础。只要用好了这 9 种算法，面对需要分析和挖掘的数据，你已经就拥有了 9 种非常强大的武器，可以开始战斗了。

那么，你可能会疑惑：面对新的问题以及需要分析、挖掘的数据，如何快速的定位最合适的算法呢？这是一个很好的问题，同时也是一个很大的课题，而且这个问题也没有直接且确定的答案。不过，今天这一讲，我会试着根据我的经验和知识，给你总结一些简单的原则。

在接下来的介绍中，我们的算法覆盖范围并不仅限于课程中的 9 个算法，也会涉及其它一些算法，如果有些算法让你觉得陌生，你可以自己进行一些搜索。

在这里我先给出一个 guideline：**我们可以从问题本身、标签的类型、数据集的大小、特征的数量、计算时间的要求、以及模型的可解释性这些方面，来比较和选择算法。**

## 从问题的类型开始

要选择合适的算法，我们首先还是要回到问题本身。把问题定义好，并明确你要解决的目标，是选择算法的前提。

如果你的目标是对有标签的数据进行预测或分类，那么你就需要从监督学习算法家族中进行选择；如果你的目标是从没有标签的数据中挖掘出一些信息，或者是对数据做特征工程，比如降低数据的维度，那么你就需要在无监督学习算法家族中进行选择。

如果你的目标是生成没有见过的新数据，例如生成完全不存在的人脸，或者让机器续写个哈利波特啥的，那么生成式机器学习算法值得你研究一下。近年来非常吸引眼球的生成式对抗网络 GAN（Generative Adversarial Networks）、Google 推出的 DeepDream 算法，以及变分自编码器 VAE 等，都是解决这类问题的优秀算法。

现在，我们回到最为主流的监督学习问题，来继续算法的选择。在监督学习下面，我们又有两大类问题，就是回归问题和分类问题，我们可以根据标签是连续的数值，还是离散的数值，来确定问题的类型，相信你已经非常熟悉了。这两大类问题，均拥有超多的应用场景，也各自拥有一大批的算法。我们首先看一下针对回归问题的算法选择指南。

## 回归问题算法选择指南

当明确了问题本身属于回归问题后，我们就需要在线性回归、决策树、随机森林、XGBoost、朴素贝叶斯以及神经网络这些常见的回归算法中进行选择。这时候，我们就需要考虑数据集大小、特征的维度（也就是特征的多少）、训练所需的时间等因素。

当你的回归问题并不复杂，并且希望从易于解释的模型开始时，我建议你选择线性回归模型作为可靠的首选基准算法，线性回归对大、小数据集都适用，而且也可以处理高维特征数据。

如果你的数据集特征和数据样本数量都不是很多，而且特征之间有关联关系，那么 SVM（支持向量机）可以作为一个选择，这个模型对于特征数量有限、意义接近的中等大小的数据集来说比较强大。在使用 SVM 之前，需要进行特征缩放。

如果你手头上的数据集样本数量和特征数量都十分巨大，那么可以考虑朴素贝叶斯模型，它比线性模型的速度要快得多，适用于非常大的数据集和高维数据，不过，它的性能通常

要低于线性模型。

当你对模型运行速度有要求的时候，比如你的模型是在线训练、在线预测，那么决策树可以作为你的一个选择。因为它解决回归问题的速度很快，而且也不需要数据缩放。决策树的另一个优点是可以进行可视化，而且非常容易解释。

不过你要注意，如果参数设置不当，决策树就会出现过拟合的现象；如果限制了树的深度的话，又比较容易出现精度不够的问题。因此，决策树通常是作为集成学习方法的基模型而存在的，很少独立使用。

如果你追求的是模型的性能和表现，那么，随机森林几乎总是比单棵决策树的表现要好，它的性能非常强大，也不需要数据缩放。但随机森林并不合适处理高维稀疏数据集。

当然，XGBoost 的性能通常比随机森林还略高一点。与随机森林相比，XGBoost 的训练速度虽然更慢，但预测速度更快，需要的内存也更少。不过，在参数方面，XGBoost 可调的外部参数比随机森林更多，所以调参时候会更繁琐一些。

另外，如果你的问题是时间序列问题，或者特征数量极为巨大，又没有良好的结构，而且特征之间可能存在非线性依赖关系的时候，你应该考虑使用深度神经网络。因为深度神经网络可以构建非常复杂的模型来解决这类问题，特别是对于大型数据集而言，很有优势。

但是，请你注意，深度神经网络难于解释，如果你需要优化过程的具体推导细节，那深度学习模型很难给出。此外，它对数据缩放和参数选取也比较敏感，而且，大型神经网络需要很长的训练时间。这些都是你需要根据实际情况考量的因素。

总之，面对新数据集，我建议你通常最好先从简单模型开始，比如线性模型、朴素贝叶斯或最近邻 KNN，看能得到什么样的结果。对数据有了进一步了解之后，你可以考虑构建更复杂模型的算法，比如随机森林、梯度提升决策树、SVM 或神经网络。

下面我们再来看分类问题的算法选择技巧。

## 分类问题算法选择指南

分类问题的算法选择，在思路上和回归问题略有不同。对于分类问题，我更多是基于问题的性质来寻找合适的算法，而不是从数据集大小、特征数目的多少以及训练时间的快慢来

考量。

当我们要解决用户是否会流失、欺诈检测、促销和裂变效果等问题时，可以采用逻辑回归算法作为这些普通分类问题的基准算法，因为它简单且易于解释。当然，其它分类算法也可以用于解决这类问题。

而对于投资方面的决策、银行贷款的评估决策等，我们经常使用决策树算法。因为决策树算法最直观，最接近人类的思维方式，算法也非常易于用图表展示。当然，决策树在分类问题中也容易出现过拟合问题，因此，决策树很少单独作为一种算法来解决问题，一般都是作为集成学习方法的基模型出现。

对于类别比例不平衡的问题，比如检测生产系统中的坏件，预测高风险的病患等，我推荐你采用随机森林算法，它解决了决策树算法的过拟合问题。同时，XGBoost 算法和随机森林类似，也是解决各种分类问题的好选择，性能比随机森林略高。

如果你要解决文本的情感属性判断、文本分类、推荐系统或者是人脸识别问题，那么朴素贝叶斯算法是深度学习出现之前的首选算法。和深度学习相比，朴素贝叶斯算法的优势在于可解释性较好。因此，在要求算法具有良好的解释性时，你可以通过朴素贝叶斯算法解决这类问题。

而对于疾病诊断和判断、手写数字识别等多种分类问题，SVM 是一种比较好的解决方案。当然深度学习也可以解决这类问题，和深度学习相比，SVM 的优势也在于可解释性较好。因此，在要求算法具有良好的解释性时，我们用 SVM 算法来解决多种分类问题比较好。

最后，我不得不提的是，深度学习神经网络实为解决大数据时代的分类问题的大杀器，我们前面所说的各种分类问题，都可以用深度学习来解决。尤其是非结构化的分类问题，比如语音识别、计算机视觉、自然语言处理、文本分类、自动驾驶等，深度学习都是首选项。

当然，非要“鸡蛋里挑骨头”的话，那就是在数据量小或者特征结构很好的情况下，深度学习的优势体现得不是很明显，我们还是要尽量选择简单的方案；另外，深度学习的可解释性不好，就像一个黑箱，因此，调参的过程也比较费力。

好了，这就是分类问题算法选择的一些原则。下面，我再给你总结一下选择算法时的考量因素。

## 选择算法时的其它考量因素

我们前面说，**选择算法时有两个最主要的出发点，第一是问题的类型**，我们要回到问题本身，看它是监督学习还是无监督学习；**第二是预测的标签类型**，一般来说，监督学习问题最为主流，这时候我们需要根据标签来进一步确定，问题属于回归问题还是分类问题。

除此之外，我们在选择算法时还有一些其他的考虑因素，我们一起看看。

## 训练数据的大小

通常，我们都希望能收集到大量数据，获得更可靠的预测。但很多时候，数据的量是一个制约因素，我们也没办法。因此，如果你的训练数据集较小，也就是数据样本较少，但是特征数较多（如文本数据），这时应该选择具有高偏差、低方差的算法，比如如线性回归、朴素贝叶斯或线性 SVM。

如果你的训练数据足够大，并且特征数量也比较少，那你就可以使用低偏差、高方差的算法，如 KNN、决策树或核 SVM。当然，对于数据很多的情况，神经网络也是很好的选择。

## 特征的数量

除数据样本量之外，特征的数量也影响模型的选择。数据集可能有大量的特征，有些特征可能并不是和问题十分相关，因此也并不重要。某种数据集，例如遗传学问题或文本数据，与数据样本的数量相比，特征的数量可能非常大。

过多的特征会使多数算法的训练时间过长，不过，SVM 模型就不会受特征数量的约束，因此，对于大特征空间和较少数据量的情况，SVM 模型是我们的最佳选择。当然，如果你要用其他的机器学习模型，可以使用 PCA 和特征选择技术来降低特征的维度，选择重要特征进行学习。

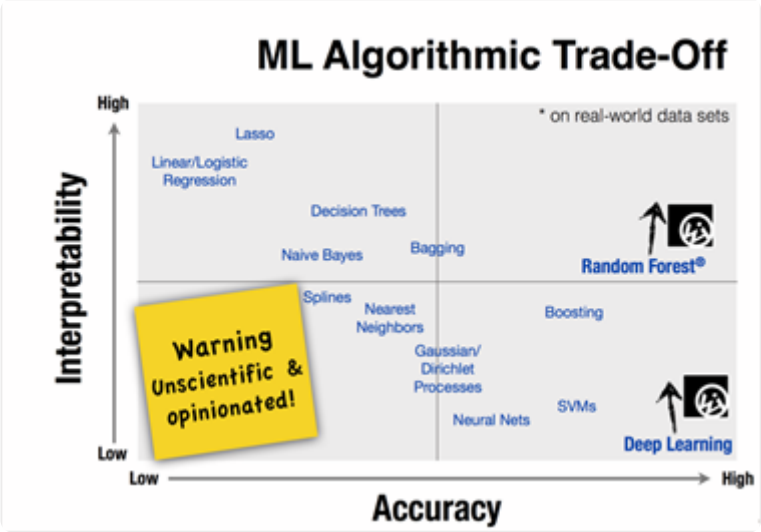
除此之外，深度学习也为我们处理巨大特征量的问题提供了非常好的解决方案。当特征数量巨大且特征空间结构复杂时，深度学习神经网络是绝佳选择。

## 性能和可解释性的权衡

有时我们还必须在模型的性能和可解释性之间进行权衡，比如有些合规性文件会要求公司在应用 AI 时，在给出判断结论的同时给出算法推导的原理和过程，这时候，我们采用相对简单的模型就能降低此部分合规性文档的解释难度。

高度可解释的算法（如线性回归模型）意味着我们可以轻松理解任何单个预测变量如何与要预测的目标相互关联，因为模型简单，所以很容易解释。但是，线性回归产生的映射函数范围小，其形状只能覆盖很小的特征空间，因此这类算法也被称为限制性算法。

也有些算法非常灵活，因为它们可以生成更广泛的映射函数形状。比如深层神经网络模型，它可以拟合任意形状的函数，但灵活的模型是以低可解释性为代价，来提供更高的准确性的。**一般来说，随着算法灵活性和准确性的增加，其可解释性会降低。**下图显示了各种算法在准确性和可解释性之间的权衡。




准确性和可解释性算法之间的权衡

至于我们要使用哪种算法，就要取决于业务问题的目标了。如果你的目标是进行严密的推理，比如疾病的确诊过程，那么限制性模型会更好，因为它们更具可解释性。如果你以更高的精度为目标，那么灵活的模型会更好。

## 速度或训练时间

更高的准确度通常也意味着更长的训练时间。此外，更大规模的数据集样本也需要更多时间来训练。在实际应用中，这个因素也会驱动算法的选择。

朴素贝叶斯、线性回归和逻辑回归这样的算法易于实现且运行迅速。像 SVM 这样的算法涉及参数调整，需要更多时间，而神经网络和随机森林，也都需要大量时间来训练数据。因此，如果你的机器学习模型是在线的应用，比如在网页上，用户选择了一个商品，你需要在一两秒钟之内呈现出推荐列表的清单，这时候你就不应该选择最精准但会耗时很长的算法了，而应该考虑朴素贝叶斯等更快的算法。

### 数据的线性程度

最后，我们还可以通过评估数据特征和标签之间的线性程度，来选择具体的算法。

许多算法都假设不同类别可以由直线（或更高维的平面或者空间）来分隔，比如逻辑回归和支持向量机。线性回归算法则假设特征和标签数据的分布趋势遵循着一条直线。如果数据是线性的，那么这些算法的表现相当不错。

然而，数据并不总是线性的，因此对于更为复杂的数据集，我们需要可以处理高维和复杂数据结构的算法，比如核 SVM、随机森林、XGBoost 和神经网络。

那么，如何找出监督学习数据集的线性程度呢？对于回归问题，我们可以像在第 3 讲中做的那样，显示特征和标签之间的散点图，看看是否能够拟合出线性回归线；对于分类问题，我们先尝试逻辑回归或线性 SVM 并检查误差值和分类性能。如果误差值很高、分类性能差，则意味着数据不是线性的，需要复杂的算法来拟合。

## 总结一下

好了，到这里我们这一讲就结束了。关于快速定位合适的机器学习算法，这其中的要点是定义好问题，明确是监督学习问题还是无监督学习问题，是分类问题还是回归问题，这能让我们排除掉不相干的算法。

在选择具体的算法时，我建议你从训练数据的大小、特征的数量、是着重考量模型的性能还是考量模型的可解释性、是否要求模型有很快的训练速度，以及数据的线性程度这几个方面，来选择最适宜的算法。

另外，我建议你从探索数据开始，熟悉你的数据。因为“更好的数据往往胜过更好的算法”，你对数据集的特征之间的性质了解得越清楚，越有可能得到高性能的模型。当然，

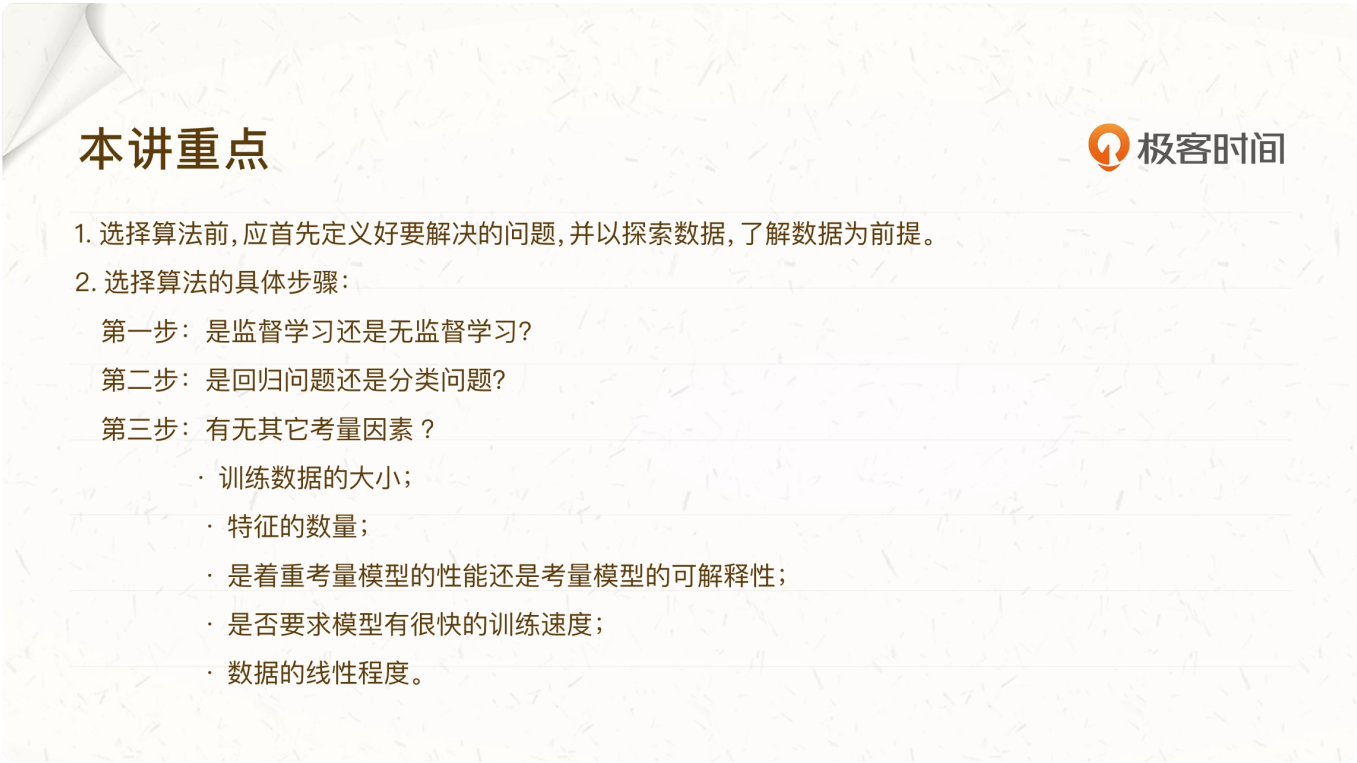
对模型背后的原理和假设越了解，以及模型外部参数设定的含义越熟悉，也越有可能得到高性能的模型。

在定位合适的机器学习算法时，还有一个最基本的原则是，从简单的模型开始构建基准模型，然后尝试更复杂的方法。

最后，请你始终记住，尽可能地尝试多种算法，多种参数组合，然后比较它们的性能，以选择最适合特定任务的算法。但也不要忘记尝试集成方法，因为它通过博彩众长，能为你提供更好的准确性。

## 思考题

这一路学习下来，面对不同的问题，你在算法选择方面有哪些心得？你发现哪些算法对于哪些问题有较好的性能呢？欢迎你在留言区和我分享你的观点，如果你认为这节课的内容有收获，也欢迎把它分享给你的朋友，我们下一讲再见！




分享给需要的人，Ta订阅后你可得 20 元现金奖励

生成海报并分享

赞 1 提建议

© 版权归极客邦科技所有，未经许可不得传播售卖。 页面已增加防盗追踪，如有侵权极客邦将依法追究其法律责任。

上一篇 18 | 增长模型：用XGBoost评估裂变海报的最佳受众群体

下一篇 20 | 模型部署：怎么发布训练好的机器学习模型？

## 精选留言 (5)

写留言

**黑山老妖**
2021-10-15

1、线性回归模型
可靠的首选基准算法，大、小数据集都适用，也可以处理高维特征数据。
2、SVM
特征数量有限、意义接近的中等大小的数据集来说比较强大。
使用之前，需要进行特征缩放。PCA 和特征选择技术来降低特征的维度，选择重要特征...
展开

**Bing**
2021-10-14

先第一遍粗略看完了所有的课程，感觉数据特征的整理比算法更重要，算法更多是去使用

它，然后使各种方式去尝试，找一个拟合程度最好的算法。我之前没有接触过机器学习，不知道我理解的对不对？

作者回复: 理解的是对的，对于机器学习的初学者（或者说算法的使用者）而言，如何整理数据、做特征工程更重要，另外一个就是了解各种算法的特点，把它们应用到各种各样的场景（数据集）之中去。
而深入研究算法、并优化算法则是下一步的事情。
当然如果目的是通过面试，算法的细节和推导可能成为非常重要的事情。这有点像我们学高等数学，为了考试不得不学，但是生活中的实用数学可能不需要那么深。——这个比喻有点不恰当。

**黄佳**
2021-10-13

楼下有同学给出了Sklearn的算法快速导航表。对于除了深度学习算法之外的算法，这个表相当有用，值得得推荐。
https://scikit-learn.org/stable/tutorial/machine_learning_map/index.html
我在博客中，还把这个表翻译成了中文版。
https://blog.csdn.net/JackyHuang79/article/details/111867086

展开

**qinsi**
2021-10-12

scikit-learn algorithm cheat-sheet: https://scikit-learn.org/stable/tutorial/machine_learning_map/index.html

展开

作者回复: SKlearn全景图

**在路上**
2021-10-11

佳哥好，学完这一讲我对数据集的大小，特征数量的多少，认识还不太清楚。多少算少，多少算中等，多少又算特别大，佳哥能举一些具体的例子吗？我在读GFS论文的时候，作者提到在2003年Google最大的集群有1000个节点，管理了300TB的数据，让我对"大"有了很直观的认识。

展开

作者回复: 嗯。大小是相对的。具体问题具体分析。有些大数据可以很大比如互联网大厂的订单信息；有些领域的数据就难于收集，比如医学数据，可能得某类疾病的人数本身就是不多。

文章中的一个观点是根据特征数量和样本数量的比例来判断数据集样本数是否够大。如果特征有上万个，而样本数只有几千个，那么可能样本数就显得太少了。